

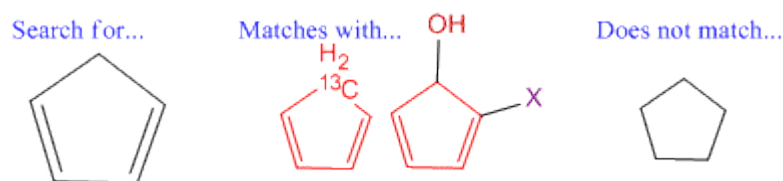
近两日都在搜索与可视化输入有关的文献，在化学领域找到一些文献或工具，如 ChemDraw 和 ChemFinder，但是在生物信息学暂时没有发现。在三维模型搜索中很早就有可视化输入的搜索，如普林斯顿大学的三维模型搜索系统。基于内容的图像搜索中也常使用草图等可视化技术作为交互方式，如 Sketch2Photo。

1、化学领域

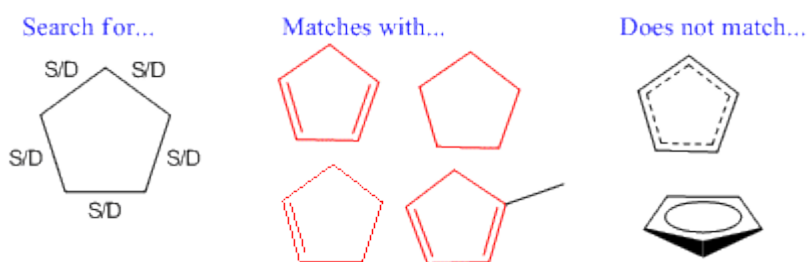
使用 ChemDraw 绘制查询结构，复制到 ChemFinder 中，对于简单的结构也可以直接在 ChemFinder 中编辑，在 ChemBioFinder 数据库中进行查询。ChemFinder 可以实现多种化学分子结构查询：

- 可变化学键查询
- 立体化学键查询
- 结合点
- 低聚物搜索
- 可变原子查询
- 含取代基原子查询
- 原子属性查询。

在 ChemFinder 的结构查询中，搜索结果中与查询条件相符的部分会以红色标明，对于每种查找类型，同时给出符合查询条件的分子及不符合查询条件的分子进行对比。例如查找符合“环戊二烯（cyclopentadiene）”条件的化学式开始。



如果想同时搜索到环戊烷（cyclopentanes）及环戊二烯（cyclopentadienes）结构，可以将化学键标注为“可变化学键（variable bond）”：用“S/D”来表示单键（single）/双键（double）。以亚结构搜索方式搜索下图左侧的结构式，环戊烷及环戊二烯出现在搜索结果中（下图中间红色结构为可搜索到的结构，右侧为不能搜索到的结构）。将化学键标注为“S/D”的方法：用鼠标选中化学键右击，出现的菜单中单击“Bond Properties”，在“Bond Type”下选择“S/D”。



在化学结构搜索中，有一套规则指定分子结构的构成，搜索时可以根据子结构进行匹配也可以根据相似性计算。“Chemical Similarity Searching”提出了关于相似性计算的方法，论文最大的贡献在于提出了抽取分子结构特征的新方法，适用于常见的度量计算。

2、三维模型

普林斯顿大学提供了一种三维模型搜索引擎的研究方案，是一种基于文本关键字、二维和三维形状及其组合的查询方式。2012 年 SIGGRAPH 上，他们又提出在搜索出的模型中框选指定一些特征进行精确搜索的方法。台湾大学的三维对象检索系统提供了一种基于文本关键字、二维草图（可包含内部细节）或选择现有模型进行查询的研究方案。模型搜索的主要方法有形状特征匹配法。

形状特征匹配的过程是：首先计算查询草图与库中模型形状特征之间的距离，然后根据数据库模型和查询草图的邻近度分类，最后将距离最近的前 K 个模型返回。直接匹配法[20]是一种形状匹配法，其相似度等于模型表面对应点距离的总和。这种方法在进行几何相似性匹配时，需要将两个模型以重心为基准点平移对齐，相似度计算简单，但是对齐操作是一个耗时的工作，对于大型数据模型库和实时系统来说，使用这种方法的效果不够理想。在实时系统中比较实用的方法是三维模型表示为形状描述符，常见的形状描述符包括：形状直方图(Shape Histogram)、形状分布(Distribution Shape)、球面调和函数(Spherical Harmonics)、三维调和函数向量(3D Harmonics Vector)、扩展高斯图像(Extended Gaussian Images)。

在实际应用中三维模型常常会有旋转、平移和缩放等几何变换，因此形状描述符应满足几何变换不变性。球面调和函数法由于其特征向量容易计算和对比，且具有几何变换不变性，适合用于检索三维模型。获取三维模型的形状描述符需要预先将三维模型体素化，然后提取其二维形状特征。

3、图像搜索

Sketch2Photo 提出了一个基于互联网的图像合成系统，它可以将用户输入的带文字标签的手绘草图半自动地转换成一张具有真实感的合成图像。该合成图像由多张互联网上搜索到的图像无缝拼接而成。该系统包含以下几个步骤：一、输入用户草图，根据文字标签从互联网自动下载图像。二、计算机对所有下载图像进行基于轮廓和内容一致性的图像过滤，去除不符合要求的图像，并将前景图像自动分割出来。三、计算最优的图像合成组合。四、对排序的前十组组合进行自动合成，将结果提供给用户，用户可以选择满意的合成结果，并进行简单的交互修正。

4、图数据

待补充

总结这些领域中的用户界面，其中两个问题最为重要：

一、如何抽取输入图形的特征，使得特征数据与数据库中的数据能够进行比较计算？

二、如何计算相似性？

这两个问题解决好了，那么文章基本确定了。